



TITLE:

2H型遷移金属ダイカルコゲナイド
層間化合物の電子状態と磁性(大阪
大学基礎工学研究科物理系専攻,修
士論文題目・アブストラクト
(1987年度)その2)

AUTHOR(S):

山崎, 靖

CITATION:

山崎, 靖. 2H型遷移金属ダイカルコゲナイド層間化合物の電子状態と磁性(大阪大学基礎工学研究科物理系専攻,修士論文題目・アブストラクト(1987年度)その2). 物性研究 1988, 50(6): 1075-1075

ISSUE DATE:

1988-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93354>

RIGHT:

2H型遷移金属ダイカルコゲナイド層間化合物の電子状態と磁性

山崎 靖

2H型層状遷移金属ダイカルコゲナイド TX_2 ($T=Nb, Ta; X=S, Se$) は、種々の原子をその層間に取り入れること（インターカレート）により、母体にはない物理的性質をもつようになる。特に 3d 遷移金属 M をインターカレートした物質 M_xTX_2 はゲスト原子の濃度、種類などによって変化に富んだ磁性を示す。実験では磁気転移温度において電気抵抗や Hall 係数の異常が観測されており、このことからゲスト原子間の磁氣的相互作用に伝導電子が重要な役割をしていると考えられる。また、常磁性状態の帯磁率から見積もられる有効モーメントは孤立したイオンの 3d 電子スピンモーメントに近いことからゲスト原子の 3d 状態はよく局在していると思われる。

我々は M_xTX_2 の磁性を微視的に理解する目的として、もっとも重要なゲスト原子間相互作用になり得ると思われる RKKY 相互作用を現実的な電子帯構造に基づいて評価した。我々のとったモデル及び仮定は以下のとおりである。

- (1) 母体の電子帯構造としては Woosley and Wexlerらによって得られた NbS_2 のバンド構造を強結合近似で再現したものをを用いる。
- (2) 母体の伝導帯はゲスト原子からの電子供給に際して不変であると仮定し、ゲスト原子の濃度及び価数の違いはフェルミレベルの違いとして反映される。(Rigid Band Model)
- (3) 局在モーメント伝導電子の交換相互作用は δ 関数的である。

具体的な数値計算については $x=1/4$ と $1/3$ 、価数については $+2$ 価と $+3$ 価の場合について行なった。得られた RKKY 相互作用は長距離にわたっており、Ferro 的そして Antiferro 的な相互作用が繰返し、振動している。また、濃度及び価数の違いによって、相互作用の大きさ、符号等が大きく変化しており、その結果予想される秩序状態は様々であった。この結果及び実験事実との対応等について議論する。